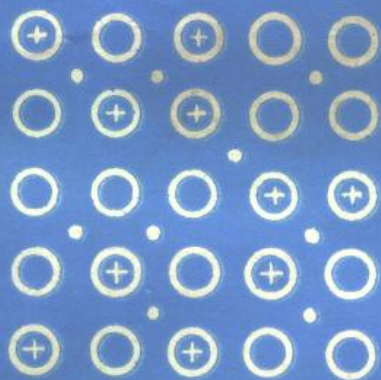


无机化学规律初探



北京师范大学出版社

无机化学规律初探

黄佩丽 编



北京师范大学出版社

无机化学规律初探

黄佩丽 编

*

北京师范大学出版社出版
新华书店北京发行所发行
解放军七二二六印刷厂印刷

*

开本: 787×1092 1/32 印张: 6.5 字数: 133千

1983年6月第1版 1983年6月第1次印刷

印数: 1—25,000

统一书号: 13243·35 定价: 0.70元

前 言

本书是“无机化学”的一本参考书。书中对无机化学教学中的一些疑难问题，运用结构化学和热力学等基础理论作了简单扼要的论述，以期有助于无机化学的“教”和“学”。

编者根据多年教学实践的体会，在参阅了国内外有关资料的基础上，对一些易于混淆的基本概念；难于分辨的化合物的性质；某些异常的实验现象和元素性质变化规律等，从理论上给予了一定的解释和说明。例如“酸碱反应与氧化还原反应”；“氢酸的强度”；“金属元素高低价变化规律”；“三价水合铁离子是棕黄色的吗？”等都从理论上进行了分析和阐述，这对某些概念的理解，元素性质变化规律的掌握将是十分有益的。

全书内容着重于以下三方面：

一、基本概念辨析：通过辨别分析方式将易于混淆的两个概念进行对比，在对比中搞清每个概念的确切含义与两者的联系和区别。并且注意说明概念的来龙去脉和在无机化学中的应用与局限性。例如“原子价与氧化数”；“几率密度与电子云”；“键离解能与键能”；“电子亲合能与电负性”等概念进行了辨析。

二、元素性质变化规律和周期表：这部分内容是综合了周期表中各区元素性质变化的规律，并从结构特点上进行说明。如对为什么典型元素氧化态的变化是不连续的，过渡元素

是连续的；为什么 p 区金属元素从上到下低价趋于稳定， d 区元素则相反；为什么同周期过渡元素原子半径变化与典型元素不同等问题，都进行了解释。

三、无机物的性质：本部分对某些无机物的性质从物质结构的内因和热力学等方面进行分析。如第二周期元素与第三周期元素性质绝然不同的原因；又如 $Mn(II)$ 极不稳定，而 $Fe(II)$ 却很稳定的原因等。此外还通过热力学能量变化去分析为什么 s 区的重金属元素易于形成稳定的过氧、超氧化物。

为适应中学化学教学的需要，还选入了部分中学化学教学中某些基本概念、基础理论和基础知识问题，如元素与核素，同位素与同量素；原子量与原子质量；分子式与化学式；能级与能级组；中和与水解；铜盐的颜色与性质等。

本书所选内容较广泛，由浅入深。可供师范院校、综合大学化学系师生，中学化学教师等参考。

本书在编写过程中，曾得到北京师范大学化学系陈伯涛老师的帮助和指正。书内插图由北京师范大学化学系臧威成老师描绘。在此一并致以衷心的感谢。

由于编者水平所限，不当之处恳切希望读者批评指正。

编 者 1982.7

目 录

I、基本概念辨析

1. 元素与核素, 同位素与同量素…………… (1)
2. 分子式与分子量, 化学式与式量…………… (2)
3. 原子量与原子质量…………… (3)
4. 摩尔、摩尔质量…………… (4)
5. 波函数 (ψ) 与原子轨道 …………… (6)
6. 几率密度, 电子云与原子轨道…………… (7)
7. 屏蔽效应与钻穿效应…………… (11)
8. 有效核电荷对元素性质的影响…………… (14)
9. 能级与能级组…………… (17)
10. 共价半径、金属半径、范德华半径…………… (20)
11. 电子亲合能与电负性…………… (22)
12. 轨道杂化…………… (24)
13. 价层电子对互斥 (VSEPR) 理论…………… (27)
14. 键离解能与键能…………… (30)
15. 生成热 (焓) 与键能…………… (32)
16. 化学反应的方向和混乱度…………… (34)
17. 原子价与氧化数…………… (37)
18. 氢键与氢桥键…………… (38)
19. 化学反应速度与质量作用定律…………… (40)
20. 温度升高, 速度常数 k 和平衡常数 K

都增大吗?	(43)
21. 活化能与反应热	(47)
22. 说 AB_2 、 AB_3 、 AB_4 等类型的同类型分子具 有相同几何构型的特性, 对吗?	(49)
23. CO 、 NO 是中性氧化物吗?	(50)
24. 离子极化	(53)
25. 酸碱中和反应都用 " $H^+ + OH^- = H_2O$ " 的离 子方程式来表示, 对不对?	(54)
26. 盐的水解反应都能进行到底吗?	(56)
27. 水解与氨解	(59)
28. “酸的浓度” 可不可以简称为酸度?	(61)
29. 沉淀平衡中固态物质的浓度	(62)
30. $BaSO_4 + Na_2CO_3 = BaCO_3 + Na_2SO_4$ 这一反 应会不会发生?	(64)
31. 水溶液中的离子反应都是瞬间完成的吗?	(66)
32. 为什么 $pH = 4$ 的酸性溶液中能生成弱碱 $Fe(OH)_3$ 沉淀?	(68)
33. 电极电势和电离能	(69)
34. 用能斯特方程计算非标准态电池电动势时应 注意什么?	(71)
35. 酸碱反应与氧化还原反应	(74)
36. 配位数与配位体	(78)
37. 什么叫络合物?	(79)
38. 含氮氧化物配体络合物的命名	(81)
39. “复盐” 存在吗?	(82)

40. 歧化反应与自氧化还原反应·····	(83)
-----------------------	------

Ⅱ、元素性质变化规律和周期表

41. 典型元素、过渡元素、内过渡元素·····	(85)
42. 典型元素与过渡元素原子半径的变化·····	(87)
43. 典型元素与过渡元素的氧化态变化规律 ·····	(88)
44. 铜族元素为什么有大于族数的氧化数? ·····	(92)
45. 对角线关系·····	(92)
46. 镧系收缩·····	(94)
47. 惰性电子对效应·····	(96)
48. 第二周期锂、铍的特殊性·····	(98)
49. 第二周期 p 区元素与同族重元素的比较 ·····	(101)
50. 碳酸盐和碱式碳酸盐形成的条件 ·····	(104)
51. 金属元素高低价转化的规律 ·····	(107)
52. 第一过渡系列正二价离子水合热的变化 ·····	(110)
53. 含氧酸的强度 ·····	(112)
54. 氢酸的强度 ·····	(114)
55. 非金属卤化物与金属卤化物的水解 ·····	(117)
56. 氯的含氧酸的氧化性为什么 $\text{ClO}^- > \text{ClO}_3^-$ $> \text{ClO}_4^-$ ·····	(119)
57. 多硫酸与连多硫酸 ·····	(121)
58. 为什么含氧酸越弱, 越易形成多酸?·····	(123)

59. 缩合酸的酸性为什么比单酸强? (125)
60. d 区金属与 s 区、 p 区金属的熔点变化为何不同? (126)
61. “内过渡元素系列”即镧系、锕系是从 La、Ac 开始还是从 Ce、Th 开始? 哪个正确? (130)
62. 长周期表中 A、B 分族的两种分类, 哪种正确? (132)
63. 周期表中元素原子量的不规律性 (133)

Ⅲ、无机物的性质

64. 酸式盐与正盐的溶解度 (135)
65. 络离子与固体化合物的颜色 (136)
66. 卤素在水中的反应与 pH 的关系 (138)
67. II_B 族中 Hg 的特殊性 (142)
68. 为什么半径大的 s 区金属易形成非正常氧化物? (144)
69. 金属钠在液氨中为什么和在水中不同? (146)
70. 为什么卤化硼的酸性是 $\text{BF}_3 \ll \text{BCl}_3 < \text{BBr}_3$? (147)
71. 为什么 BF_3 与 BCl_3 的水解性不同? (148)
72. 为什么 BH_3 只能以二聚体 B_2H_6 存在, BF_3 却能以单体存在? (149)
73. 浓硝酸与稀硝酸的氧化性 (150)
74. 碘在有机溶剂中的颜色为何不同? (152)
75. 为什么磷酸不是氧化剂, 而硫酸、高氯酸是

- 强氧化剂?..... (154)
76. 为什么 Mn(II) 不稳定, Fe(III) 稳定?
..... (156)
77. 第一过渡系列中为什么唯铜有 +1 价稳定化合物, 而铜的 +1 价水合离子却又很不稳定?
..... (157)
78. Cu(OH)_2 能溶于氨水, 是否说明 Cu(OH)_2 有酸性?..... (160)
79. 固态的 CuCl_2 、 CuCl_2 的稀溶液及浓溶液的颜色为何各不相同?..... (162)
80. 金属锌为什么比铜活泼?..... (163)
81. FeCl_3 能腐蚀 Cu, 而铁比铜离子化倾向大, 有无矛盾?..... (164)
82. 为什么镓的熔点特别低, 汞在常温下为液体?
..... (166)
83. 硫酸盐和矾 (167)
84. 为什么无水 CrCl_3 不溶于水, 而当有微量 Cr(II) 、 Sn(II) 存在时就很易溶于水?
..... (169)
85. $\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ 与 $\text{Cr(NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$ 的颜色 (171)
86. 钒的颜色 (172)
87. 水合阳离子对无机盐性质的影响 (175)
88. 普鲁士蓝与滕氏蓝是同一种物质吗?..... (178)
89. 轻过渡元素与重过渡元素 (180)
90. Na_3AsO_4 和 H_2S 作用生成 As_2S_5 还是 As_2S_3 ?
..... (182)

91. HgCl_2 和 H_2S 作用时的颜色变化过程	(184)
92. 三价水合铁离子是棕黄色的吗?.....	(184)
93. 久置于空气中的硫化钠为什么会变黄?	(186)
94. $\text{Fe}(\text{III})$ 离子与 S^{2-} 离子作用的产物是什么?	(189)
95. 臭氧的分子结构	(190)
参考文献	(195)

I、基本概念辨析

1. 元素与核素，同位素与同量素

元素 元素是原子核中质子数相同的一类原子的总称。元素是以核电荷数为标准对原子进行分类的，因此原子的核电荷数是决定元素性质的关键。

核素 核素是具有一定数目的质子和一定数目的中子的一种原子。例如原子核中有 6 个质子和 6 个中子的碳原子，它们的质量数是 12，称碳-12 核素，或写为 ^{12}C 核素。原子核中有 6 个质子和 7 个中子的碳原子质量数为 13，称 ^{13}C 核素。氧元素有三种核素： ^{16}O 、 ^{17}O 、 ^{18}O 核素。这种具有多种核素的元素称多核素元素，而天然存在的钠元素只有质子数为 11，中子数为 12 的一种钠原子 $^{23}_{11}\text{Na}$ （即 ^{23}Na ），称为单一核素元素。

同位素 质子数相同而中子数不同的同一元素的不同原子互称同位素。也可以说多核素元素中的不同核素互称同位素。同种元素的不同核素质子数相同，在周期表中占同一位置，这就是同位素的原意。同位素有的是稳定的称稳定同位素；有的具有放射性，称放射性同位素。天然元素大都是由几种同位素组成的混和物。目前已发现氢有三种同位素： ^1_1H （气）和 ^2_1H （氘），另有一种 ^3_1H 氚（为人造氢的同位素）。氯在自然界有两种稳定同位素： $^{35}_{17}\text{Cl}$ 、 $^{37}_{17}\text{Cl}$ 。碳有三种同位素，

$^{12}_6\text{C}$, $^{13}_6\text{C}$ 为稳定同位素, $^{14}_6\text{C}$ 为放射性同位素。同一元素的各种同位素的原子核虽有差别, 但它们的核外电子数相同, 因此, 它们的化学性质相同。同一元素的各种同位素按一定的比例均匀地混和在一起存在于自然界的各种矿物资源中与合成的化合物中, 如碳的稳定同位素中 $^{12}_6\text{C}$ 为 98.89%, $^{13}_6\text{C}$ 为 1.11%。

同量素 质量数相同, 质子数不同, 分属于不同元素的几种原子互称同量素。例如 $^{36}_{16}\text{S}$ 和 $^{36}_{18}\text{Ar}$ 虽质量数都是 36, 但由于它们的质子数分属于不同元素——硫和氩, 因此硫和氩称为同量素。同量素是由于同位素的存在而使某些质子数不同的原子的质量数相同, 它们亦称**异序素**。由此可见, 一种元素的原子, 其基本特征不是原子质量, 而是原子序数。

2. 分子式与分子量, 化学式与式量

分子式与分子量 用元素符号来表示物质的分子组成的式子叫分子式。分子量是组成该分子的各原子的原子量的总和。例如, 二氧化碳分子根据实验测定是由 1 个碳原子和 2 个氧原子组成的, 分子式为 CO_2 , CO_2 的分子量是:

$$12 + 2 \times 16 = 44.$$

化学式与式量 有一些物质并不是由分子聚集而成, 而是由原子或离子构成的, 如食盐、金刚石、金属铁等。它们是不能有单个分子存在的一类物质, 因而就不能用分子式表示, 而只能用化学式表示。所谓化学式就是用一定化学符号或其组合来表示物质的元素组成和化合物的各种元素原子(或离子)数目的相对比数。例如 NaCl 表示它是 Na 离子与 Cl 离子的化合物, 其化合比是 1:1。它也叫做最简式, 因为我

们无法测出 NaCl 的确定分子量，也可以说多么大的一块食盐便是多么大的一个分子(无限分子)。代表碳和铁单质的 C 和 Fe 也只能是最简式(或实验式)，不是分子式，因为在普通情况下，没有 C 和 Fe 的单个分子。习惯上最简式就叫做化学式(略去最简二字)以区别于分子式。这个化学式所代表的质量称**式量**，如把 NaCl 代表的质量 58.5 称为 NaCl 的式量。

由此可见，化学式和分子式并不等同，当一个化学式能正确地反映出一种分子的组成，它所代表的质量又可以通过实验加以测定的，那么，这个化学式就叫做分子式。

3. 原子量与原子质量

原子量 原子量是元素的相对原子质量的简称。根据国际原子量委员会规定的最新定义(1979年)，一种元素的原子量是“该元素 1 摩尔质量对核素 ^{12}C 1 摩尔质量 $\frac{1}{12}$ 的比值。”原子量的代表符号是 $A_r(E)$ ， A_r 代表相对原子质量， E 代表元素。例如氯元素的原子量等于 35.453 可表示为 $A_r(\text{Cl}) = 35.453$ 。应注意国际原子量是一种没有量纲的(即无单位的)数量，也就是说原子量是一种相对比值。

原子质量 某核素一个原子的质量称为该核素的原子质量，简称原子质量(也有称同位素质量)。1973 年国际计量局公布了原子质量的单位，规定一个 ^{12}C 核素原子质量的 $\frac{1}{12}$ 为统一的 1 原子质量单位，用“u”表示。u 的值为 $(1.66043 \pm 0.00008) \times 10^{-27} \text{kg}$ 。 ^3_1H 原子质量 $= 3.016049 \text{u}$ ， $^{12}_6\text{C}$ 原子质量 $= 12.000000 \text{u}$ ， $^{16}_8\text{O}$ 原子质量 $= 15.994915 \text{u}$ ， $^{17}_8\text{O}$ 原子质量 $= 16.999131 \text{u}$ ， $^{18}_8\text{O}$ 原子质量 $= 17.999161 \text{u}$ ， $^{23}_{11}\text{Na}$ 原子质量 $= 22.989769 \text{u}$ ， $^{24}_{12}\text{Mg}$ 原子质量 $= 23.985042 \text{u}$ ， $^{27}_{13}\text{Al}$ 原子质量 $= 26.981538 \text{u}$ ， $^{31}_{15}\text{P}$ 原子质量 $= 30.973762 \text{u}$ ， $^{32}_{16}\text{S}$ 原子质量 $= 31.972071 \text{u}$ ， $^{35}_{17}\text{Cl}$ 原子质量 $= 34.968852 \text{u}$ ， $^{37}_{17}\text{Cl}$ 原子质量 $= 36.965903 \text{u}$ ， $^{39}_{19}\text{K}$ 原子质量 $= 38.963707 \text{u}$ ， $^{40}_{20}\text{Ca}$ 原子质量 $= 39.962591 \text{u}$ ， $^{43}_{21}\text{Sc}$ 原子质量 $= 42.961858 \text{u}$ ， $^{45}_{22}\text{Ti}$ 原子质量 $= 44.955912 \text{u}$ ， $^{47}_{23}\text{V}$ 原子质量 $= 46.947713 \text{u}$ ， $^{50}_{24}\text{Cr}$ 原子质量 $= 49.946129 \text{u}$ ， $^{52}_{24}\text{Cr}$ 原子质量 $= 51.940510 \text{u}$ ， $^{54}_{26}\text{Fe}$ 原子质量 $= 53.939612 \text{u}$ ， $^{56}_{26}\text{Fe}$ 原子质量 $= 55.934936 \text{u}$ ， $^{58}_{28}\text{Ni}$ 原子质量 $= 57.935343 \text{u}$ ， $^{60}_{28}\text{Ni}$ 原子质量 $= 59.930786 \text{u}$ ， $^{63}_{29}\text{Cu}$ 原子质量 $= 62.929598 \text{u}$ ， $^{65}_{29}\text{Cu}$ 原子质量 $= 64.927789 \text{u}$ ， $^{67}_{30}\text{Zn}$ 原子质量 $= 66.927127 \text{u}$ ， $^{69}_{30}\text{Zn}$ 原子质量 $= 68.925581 \text{u}$ ， $^{70}_{30}\text{Zn}$ 原子质量 $= 69.925325 \text{u}$ ， $^{72}_{32}\text{Ge}$ 原子质量 $= 71.92147 \text{u}$ ， $^{73}_{32}\text{Ge}$ 原子质量 $= 72.923437 \text{u}$ ， $^{74}_{32}\text{Ge}$ 原子质量 $= 73.921328 \text{u}$ ， $^{76}_{34}\text{Se}$ 原子质量 $= 75.919219 \text{u}$ ， $^{77}_{34}\text{Se}$ 原子质量 $= 76.919514 \text{u}$ ， $^{78}_{34}\text{Se}$ 原子质量 $= 77.916374 \text{u}$ ， $^{80}_{34}\text{Se}$ 原子质量 $= 79.916522 \text{u}$ ， $^{82}_{34}\text{Se}$ 原子质量 $= 81.916729 \text{u}$ ， $^{84}_{36}\text{Kr}$ 原子质量 $= 83.911508 \text{u}$ ， $^{86}_{36}\text{Kr}$ 原子质量 $= 85.910610 \text{u}$ ， $^{88}_{36}\text{Kr}$ 原子质量 $= 87.913522 \text{u}$ ， $^{90}_{36}\text{Kr}$ 原子质量 $= 89.912488 \text{u}$ ， $^{92}_{38}\text{Sr}$ 原子质量 $= 91.926156 \text{u}$ ， $^{94}_{38}\text{Sr}$ 原子质量 $= 93.924201 \text{u}$ ， $^{96}_{38}\text{Sr}$ 原子质量 $= 95.921750 \text{u}$ ， $^{98}_{38}\text{Sr}$ 原子质量 $= 97.919720 \text{u}$ ， $^{100}_{38}\text{Sr}$ 原子质量 $= 99.916478 \text{u}$ ， $^{102}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 101.92581 \text{u}$ ， $^{104}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 103.922992 \text{u}$ ， $^{106}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 105.920939 \text{u}$ ， $^{108}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 107.918092 \text{u}$ ， $^{110}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 109.915145 \text{u}$ ， $^{112}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 111.912298 \text{u}$ ， $^{114}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 113.909351 \text{u}$ ， $^{116}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 115.906404 \text{u}$ ， $^{118}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 117.903457 \text{u}$ ， $^{120}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 119.900510 \text{u}$ ， $^{122}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 121.897563 \text{u}$ ， $^{124}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 123.894616 \text{u}$ ， $^{126}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 125.891669 \text{u}$ ， $^{128}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 127.888722 \text{u}$ ， $^{130}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 129.885775 \text{u}$ ， $^{132}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 131.882828 \text{u}$ ， $^{134}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 133.879881 \text{u}$ ， $^{136}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 135.876934 \text{u}$ ， $^{138}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 137.873987 \text{u}$ ， $^{140}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 139.871040 \text{u}$ ， $^{142}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 141.868093 \text{u}$ ， $^{144}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 143.865146 \text{u}$ ， $^{146}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 145.862199 \text{u}$ ， $^{148}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 147.859252 \text{u}$ ， $^{150}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 149.856305 \text{u}$ ， $^{152}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 151.853358 \text{u}$ ， $^{154}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 153.850411 \text{u}$ ， $^{156}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 155.847464 \text{u}$ ， $^{158}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 157.844517 \text{u}$ ， $^{160}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 159.841570 \text{u}$ ， $^{162}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 161.838623 \text{u}$ ， $^{164}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 163.835676 \text{u}$ ， $^{166}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 165.832729 \text{u}$ ， $^{168}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 167.829782 \text{u}$ ， $^{170}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 169.826835 \text{u}$ ， $^{172}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 171.823888 \text{u}$ ， $^{174}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 173.820941 \text{u}$ ， $^{176}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 175.817994 \text{u}$ ， $^{178}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 177.815047 \text{u}$ ， $^{180}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 179.812100 \text{u}$ ， $^{182}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 181.809153 \text{u}$ ， $^{184}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 183.806206 \text{u}$ ， $^{186}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 185.803259 \text{u}$ ， $^{188}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 187.799812 \text{u}$ ， $^{190}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 189.796865 \text{u}$ ， $^{192}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 191.793918 \text{u}$ ， $^{194}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 193.790971 \text{u}$ ， $^{196}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 195.788024 \text{u}$ ， $^{198}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 197.785077 \text{u}$ ， $^{200}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 199.782130 \text{u}$ ， $^{202}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 201.779183 \text{u}$ ， $^{204}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 203.776236 \text{u}$ ， $^{206}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 205.773289 \text{u}$ ， $^{208}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 207.770342 \text{u}$ ， $^{210}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 209.767395 \text{u}$ ， $^{212}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 211.764448 \text{u}$ ， $^{214}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 213.761501 \text{u}$ ， $^{216}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 215.758554 \text{u}$ ， $^{218}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 217.755607 \text{u}$ ， $^{220}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 219.752660 \text{u}$ ， $^{222}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 221.749713 \text{u}$ ， $^{224}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 223.746766 \text{u}$ ， $^{226}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 225.743819 \text{u}$ ， $^{228}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 227.740872 \text{u}$ ， $^{230}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 229.737925 \text{u}$ ， $^{232}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 231.734978 \text{u}$ ， $^{234}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 233.732031 \text{u}$ ， $^{236}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 235.729084 \text{u}$ ， $^{238}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 237.726137 \text{u}$ ， $^{240}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 239.723190 \text{u}$ ， $^{242}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 241.720243 \text{u}$ ， $^{244}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 243.717296 \text{u}$ ， $^{246}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 245.714349 \text{u}$ ， $^{248}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 247.711402 \text{u}$ ， $^{250}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 249.708455 \text{u}$ ， $^{252}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 251.705508 \text{u}$ ， $^{254}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 253.702561 \text{u}$ ， $^{256}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 255.699614 \text{u}$ ， $^{258}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 257.696667 \text{u}$ ， $^{260}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 259.693720 \text{u}$ ， $^{262}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 261.690773 \text{u}$ ， $^{264}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 263.687826 \text{u}$ ， $^{266}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 265.684879 \text{u}$ ， $^{268}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 267.681932 \text{u}$ ， $^{270}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 269.678985 \text{u}$ ， $^{272}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 271.676038 \text{u}$ ， $^{274}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 273.673091 \text{u}$ ， $^{276}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 275.670144 \text{u}$ ， $^{278}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 277.667197 \text{u}$ ， $^{280}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 279.664250 \text{u}$ ， $^{282}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 281.661303 \text{u}$ ， $^{284}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 283.658356 \text{u}$ ， $^{286}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 285.655409 \text{u}$ ， $^{288}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 287.652462 \text{u}$ ， $^{290}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 289.649515 \text{u}$ ， $^{292}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 291.646568 \text{u}$ ， $^{294}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 293.643621 \text{u}$ ， $^{296}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 295.640674 \text{u}$ ， $^{298}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 297.637727 \text{u}$ ， $^{300}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 299.634780 \text{u}$ ， $^{302}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 301.631833 \text{u}$ ， $^{304}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 303.628886 \text{u}$ ， $^{306}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 305.625939 \text{u}$ ， $^{308}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 307.622992 \text{u}$ ， $^{310}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 309.620045 \text{u}$ ， $^{312}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 311.617098 \text{u}$ ， $^{314}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 313.614151 \text{u}$ ， $^{316}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 315.611204 \text{u}$ ， $^{318}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 317.608257 \text{u}$ ， $^{320}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 319.605310 \text{u}$ ， $^{322}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 321.602363 \text{u}$ ， $^{324}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 323.599416 \text{u}$ ， $^{326}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 325.596469 \text{u}$ ， $^{328}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 327.593522 \text{u}$ ， $^{330}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 329.590575 \text{u}$ ， $^{332}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 331.587628 \text{u}$ ， $^{334}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 333.584681 \text{u}$ ， $^{336}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 335.581734 \text{u}$ ， $^{338}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 337.578787 \text{u}$ ， $^{340}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 339.575840 \text{u}$ ， $^{342}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 341.572893 \text{u}$ ， $^{344}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 343.569946 \text{u}$ ， $^{346}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 345.566999 \text{u}$ ， $^{348}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 347.564052 \text{u}$ ， $^{350}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 349.561105 \text{u}$ ， $^{352}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 351.558158 \text{u}$ ， $^{354}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 353.555211 \text{u}$ ， $^{356}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 355.552264 \text{u}$ ， $^{358}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 357.549317 \text{u}$ ， $^{360}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 359.546370 \text{u}$ ， $^{362}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 361.543423 \text{u}$ ， $^{364}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 363.540476 \text{u}$ ， $^{366}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 365.537529 \text{u}$ ， $^{368}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 367.534582 \text{u}$ ， $^{370}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 369.531635 \text{u}$ ， $^{372}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 371.528688 \text{u}$ ， $^{374}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 373.525741 \text{u}$ ， $^{376}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 375.522794 \text{u}$ ， $^{378}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 377.519847 \text{u}$ ， $^{380}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 379.516900 \text{u}$ ， $^{382}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 381.513953 \text{u}$ ， $^{384}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 383.511006 \text{u}$ ， $^{386}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 385.508059 \text{u}$ ， $^{388}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 387.505112 \text{u}$ ， $^{390}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 389.502165 \text{u}$ ， $^{392}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 391.499218 \text{u}$ ， $^{394}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 393.496271 \text{u}$ ， $^{396}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 395.493324 \text{u}$ ， $^{398}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 397.490377 \text{u}$ ， $^{400}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 399.487430 \text{u}$ ， $^{402}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 401.484483 \text{u}$ ， $^{404}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 403.481536 \text{u}$ ， $^{406}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 405.478589 \text{u}$ ， $^{408}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 407.475642 \text{u}$ ， $^{410}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 409.472695 \text{u}$ ， $^{412}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 411.469748 \text{u}$ ， $^{414}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 413.466801 \text{u}$ ， $^{416}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 415.463854 \text{u}$ ， $^{418}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 417.460907 \text{u}$ ， $^{420}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 419.457960 \text{u}$ ， $^{422}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 421.455013 \text{u}$ ， $^{424}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 423.452066 \text{u}$ ， $^{426}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 425.449119 \text{u}$ ， $^{428}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 427.446172 \text{u}$ ， $^{430}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 429.443225 \text{u}$ ， $^{432}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 431.440278 \text{u}$ ， $^{434}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 433.437331 \text{u}$ ， $^{436}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 435.434384 \text{u}$ ， $^{438}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 437.431437 \text{u}$ ， $^{440}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 439.428490 \text{u}$ ， $^{442}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 441.425543 \text{u}$ ， $^{444}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 443.422596 \text{u}$ ， $^{446}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 445.419649 \text{u}$ ， $^{448}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 447.416702 \text{u}$ ， $^{450}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 449.413755 \text{u}$ ， $^{452}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 451.410808 \text{u}$ ， $^{454}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 453.407861 \text{u}$ ， $^{456}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 455.404914 \text{u}$ ， $^{458}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 457.401967 \text{u}$ ， $^{460}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 459.399020 \text{u}$ ， $^{462}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 461.396073 \text{u}$ ， $^{464}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 463.393126 \text{u}$ ， $^{466}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 465.390179 \text{u}$ ， $^{468}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 467.387232 \text{u}$ ， $^{470}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 469.384285 \text{u}$ ， $^{472}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 471.381338 \text{u}$ ， $^{474}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 473.378391 \text{u}$ ， $^{476}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 475.375444 \text{u}$ ， $^{478}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 477.372497 \text{u}$ ， $^{480}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 479.369550 \text{u}$ ， $^{482}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 481.366603 \text{u}$ ， $^{484}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 483.363656 \text{u}$ ， $^{486}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 485.360709 \text{u}$ ， $^{488}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 487.357762 \text{u}$ ， $^{490}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 489.354815 \text{u}$ ， $^{492}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 491.351868 \text{u}$ ， $^{494}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 493.348921 \text{u}$ ， $^{496}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 495.345974 \text{u}$ ， $^{498}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 497.343027 \text{u}$ ， $^{500}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 499.340080 \text{u}$ ， $^{502}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 501.337133 \text{u}$ ， $^{504}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 503.334186 \text{u}$ ， $^{506}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 505.331239 \text{u}$ ， $^{508}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 507.328292 \text{u}$ ， $^{510}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 509.325345 \text{u}$ ， $^{512}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 511.322398 \text{u}$ ， $^{514}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 513.319451 \text{u}$ ， $^{516}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 515.316504 \text{u}$ ， $^{518}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 517.313557 \text{u}$ ， $^{520}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 519.310610 \text{u}$ ， $^{522}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 521.307663 \text{u}$ ， $^{524}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 523.304716 \text{u}$ ， $^{526}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 525.301769 \text{u}$ ， $^{528}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 527.298822 \text{u}$ ， $^{530}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 529.295875 \text{u}$ ， $^{532}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 531.292928 \text{u}$ ， $^{534}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 533.289981 \text{u}$ ， $^{536}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 535.287034 \text{u}$ ， $^{538}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 537.284087 \text{u}$ ， $^{540}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 539.281140 \text{u}$ ， $^{542}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 541.278193 \text{u}$ ， $^{544}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 543.275246 \text{u}$ ， $^{546}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 545.272299 \text{u}$ ， $^{548}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 547.269352 \text{u}$ ， $^{550}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 549.266405 \text{u}$ ， $^{552}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 551.263458 \text{u}$ ， $^{554}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 553.260511 \text{u}$ ， $^{556}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 555.257564 \text{u}$ ， $^{558}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 557.254617 \text{u}$ ， $^{560}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 559.251670 \text{u}$ ， $^{562}_{40}\text{Zr}$ 原子质量 $= 561.248723 \$

原子量与原子质量在概念上是有区别的，前者原子量，即某元素原子与标准原子相比的相对原子质量，而原子质量为某一核素的原子质量。由质谱法测得元素的同位素丰度（即同位素的百分含量）和每一种核素的原子质量，便可求得原子量。对于氯来说，天然存在的同位素丰度： $^{35}_{17}\text{Cl}$ 为 75.35%； $^{37}_{17}\text{Cl}$ 为 24.47%，那么根据原子量的定义，氯的原子量可用下式表示：

$$\begin{aligned} \text{Ar}(\text{Cl}) &= \frac{34.96885\text{u} \times 75.53\% + 36.96590\text{u} \times 24.47\%}{12\text{u} \times \frac{1}{12}} \\ &= 35.453 \end{aligned}$$

由此式可见，原子量是无单位的，是相对比值，而原子质量是有单位的，是绝对值。从数值来看，一种元素只有一个原子量；除单一核素元素外，同种元素各核素原子质量不同。原子量与核素的丰度有关；原子质量与核素的丰度无关。

4. 摩尔、摩尔质量

摩尔 第 14 届国际计量（权度）大会在 1971 年制定了一个新的国际单位，即物质的数量单位叫做摩尔。摩尔的定义是：摩尔是一个物系中所含物质的数量，如果该系统所含的基本原体（Elementary entities）的数目与 0.012 千克碳-12（即 ^{12}C ）的原子数相等时，该数量就叫做 1 摩尔。这里所说的原体（Entity）是指在一个物系中我们计数的一个基本个体。例如对于氧气来说，在 $\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2$ 反应中，我们可以把 1 个氧分子 O_2 当作一个原体，因为氧是以 1 个

O_2 分子作为个体参加反应的；但在 $\text{H}_2 + \frac{1}{2}\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O}$ 的反应中，氧是以 $\frac{1}{2}\text{O}_2$ 作为单位参加反应的，我们就可以把 $\frac{1}{2}\text{O}_2$ 作为一个原体进行计数。根据上述摩尔的定义，0.012 千克 ^{12}C 就是 12 克 ^{12}C 。根据以往实验工作的确定，已知 12 克 ^{12}C 中含有 6.022×10^{23} 个 ^{12}C 原子，这个数目叫亚佛加德罗数，因此摩尔的定义又可表述如下：如果一个物系中所含物质的基本原体的数目为 6.022×10^{23} 个时，那么这个数量叫做 1 个摩尔。摩尔的缩写符号是 mol。在使用摩尔时，基本原体应当予以指明，可以是分子、原子、离子、电子及其它粒子，或是这些粒子的特定组合体。

摩尔质量 1 摩尔物质的质量称“摩尔质量”，用符号 M 表示，单位常用 $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 表示。

因为 1 摩尔不同元素含有相同的原子数，所以 1 摩尔不同元素的质量之比等于它们的原子量之比。显然，4.0026 克 ^4He 与 12 克 ^{12}C 含有相同原子数。4.0026 克 ^4He 即 1 摩尔 ^4He 原子， ^4He 原子的摩尔质量 = $4.0026 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。这就得出结论：任何元素原子的摩尔质量单位为 $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 时，数值上等于其原子量。

同理，可以推广到分子，离子等微粒。如水的分子量等于 18.0152，所以 18.0152 克水和 12 克 ^{12}C 含相同基本原体数。18.0152 克水是 1 摩尔水，水的摩尔质量 = $18.0152 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。氢氧根式量等于 17.0073，所以 17.0073 克 OH^- 和 12 克 ^{12}C 含有相同基本原体数，17.0073 克 OH^- 即 1 摩尔 OH^- 离子， OH^- 离子的摩尔质量 $M = 17.0073 \text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。注意原子、分子、离子的摩尔质量，过去旧术语叫做克分子、

克原子、克离子，现这些术语已废弃。

5. 波函数(ψ)与原子轨道

由于经典力学不能反映具有微粒、波动两重性的电子运动的特性，因而要用量子力学来描述电子运动的状态。波函数和原子轨道是量子力学中用来描述电子运动状态的术语。

波函数 电子在空间的运动状态是遵循由波动方程发展而来的薛定谔方程。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial Z^2} = -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi$$

式中 E 是总能量，即电子运动的动能和势能的和。 V 是势能， m 是电子的质量， h 是普朗克常数， X 、 Y 、 Z 为电子的空间坐标。 ψ 就是薛定谔方程的解，是描述电子运动状态的函数。由于薛定谔方程的解 ψ 不是一个数值，而是一个函数式，因此把 ψ 称为波函数。它是量子力学中表征微观粒子(如电子等)运动状态的一个函数。

波函数一定，则电子在空间的运动状态就确定了。如 ψ_{1s} 、 ψ_{2s} 、 ψ_{2p_x} 、 ψ_{2p_y} 、 ψ_{2p_z} 、 ψ_{3d} 、 ψ_{4f} ……分别表示电子处于不同的空间运动状态。处于一定运动状态下的电子，其各种物理量有一定值或平均值，如有一定的几率密度分布，有一定的能量，电子距核有一定的平均距离 r 等。总之，这些物理量都可以通过波函数来确定。例如，氢原子核外的电子处于基态时，用 ψ_{1s} 描述，其几率密度分布是球形对称的。在半径为 52.9 皮米的球面上电子出现的几率最大，总能量为 -2.179×10^{-18} 焦耳。

原子轨道 在量子力学中把原子体系的每一个波函数叫